



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Materials Science - quantum particle approach, PG_00071217						
Kierunek studiów	Nanotechnologia, Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2027/2028		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć specjalnościowych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		angielski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		6.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Nanotechnologii i Inżynierii Materiałowej -> Zakład Fizyki Układów Nieuporządkowanych						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. Maciej Bobrowski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr hab. Maciej Bobrowski				
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	45.0	0.0	0.0	75
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Adres kursu na platformie eNauczanie: https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=3649						
	Moodle ID: 3649 Materials Science - quantum particle approach 2027 https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=3649						
	Dodatkowe informacje:						
	stacjonarne						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	75		2.0		73.0	150
Cel przedmiotu	Cele przedmiotu: 1. Przekazanie wiedzy o zastosowaniu metod obliczeniowych kwantowych w przypadku rozwiązywania problemów zmiany struktury elektronowej w układach materiałów opartych o molekuly i kryształy: polimery, gumy, tlenki metali, reakcje chemiczne, ogniwa galwaniczne (na przykładach realizacji konkretnych projektów naukowych w grantach badawczych). 2. Nauczenie stosowania aksjomatów mechaniki kwantowej w układach małych i wieloatomowych. 3. Nauczenie powszechnie stosowanych metod kwantowych opartych o obliczane funkcje falowe: HF, CI, MCSCF, MPn, CC. 4. Nauczenie wykorzystywania baz funkcji w obliczeniach kwantowych. 5. Nauczanie interpretacji wyników dla uzyskiwanych stanów kwantowych w procesie badań nad właściwościami materiałów, w tym interpretacji właściwości w oparciu o wynikowy spin układu.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W05] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur	Student ma pogłębioną wiedzę o reprezentacji stanów kwantowych dla układów wieloelektronowych, w tym w przypadku układów wieloatomowych, o sposobie uzyskiwania stanów kwantowych dla molekuł, o sposobie uwzględnienia spinu w układach, zarówno w sposób analityczny (podczas wyprowadzania wzorów na energię) jak i praktyczny, tj. podczas wykonywania obliczeń przy pomocy komputerów. Student potrafi budować układy molekuł, wykorzystując współrzędne atomów a następnie przeprowadzać dla nich złożone obliczenia kwantowe narzucając spin. Student potrafi badać mechanizmy reakcji chemicznych wykorzystując metody kwantowe.	[SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_U03] posiada pogłębioną umiejętność posługiwania się zaawansowanymi pakietami oprogramowania specjalistycznego	Student potrafi obsługiwać program do obliczeń kwantowych na komputerze wieloprocesorowym razem z zaawansowanymi programami do wizualizacji wyników obliczeń i budowania struktur.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[K7_W02] posiada pogłębioną, podbudowaną teoretycznie, szczegółową wiedzę w zakresie zjawisk, metod i teorii odnoszących się do nanotechnologii oraz związanych z nią pokrewnych dziedzin nauki lub techniki	Student ma pogłębioną wiedzę o metodach kwantowych stosowanych podczas obliczeń dla zmiany struktury elektronowej układów chemicznych budujących też nanoukłady jak również o możliwościach i ograniczeniach takich metod.	[SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_U05] potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, numeryczne i symulacje zjawisk i procesów, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie z nanotechnologii oraz pokrewnych nauk ścisłych i przyrodniczych	Student potrafi rozwiązać problem zadany przez prowadzącego przy pomocy programu do obliczeń kwantowych: grupa złożonych układów molekularnych, np. tlenków metali, polimerów, w tym reakcje chemiczne tworzenia i rozpadu.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu

Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład Poniżej podzielono na godziny wykładów: 1--2. Przykłady zastosowania metod kwantowych w realizacji projektów badawczych skupionych na: poszukiwaniu i charakteryzowaniu nowych, złożonych materiałów do zastosowań w elektrochemii, optyce, energetyce, elektronice. 3--6. Rozwiązania r. Schrodingera dla rotatora sztywnego i atomu wodoru: harmoniki sferyczne, orbitale atomowe (w tym ich przedstawienie graficzne i właściwości orbitali), wartości własne, właściwości i sposób tworzenia orbitali molekularnych. 7--11. Metody wariacyjne: parametry nieliniowe i liniowe. Reprezentacja macierzowa. 12--14. Układy wieloelektronowe: wyznacznik Slatera, metoda Hartree-Focka, algorytm SCF, 15. Metody mieszania konfiguracji i bazy funkcji. Treści przedmiotu - laboratoria Laboratoria podzielone są w następujący sposób (według tygodni zajęć): 1. Informacje o systemie operacyjnym Linuks, organizacji sieci informatycznej wraz z dostępem do serwera obliczeniowego i dostępem do danych z zewnątrz, założenie kont na serwerze obliczeniowym. 2. Geometria molekuł i współrzędne molekuł: kartezjańskie i wewnętrzne, oraz (na końcu) pomoc ze strony programu Molden. 3. Przykładowe obliczenia na serwerze obliczeniowym dla zadanych przez prowadzącego przypadków: układy względnie małe, np. alkohol etylowy, rodniki wody, wykorzystanie współrzędnych wewnętrznych w prowadzeniu obliczeń reakcji chemicznych, obliczenia na wielu procesorach. Obliczenia przy pomocy zaawansowanego programu Gamess. 4. Omówienie wspólnego zagadnienia projektowego i podział zadań (dla każdego studenta inne zadanie), np. (1) budowa izomerów tlenków żelaza (III), kobaltu (III), itp. w konfiguracjach naprzemiennych i nienaprzemiennych, z uwzględnieniem wszystkich możliwych konfiguracji spinowych i analiza (w tym w całej grupie) prawdopodobieństwa występowania danych konfiguracji przestrzennych i stanów kwantowych wszystkich uzyskanych trwałych możliwości, i na tej podstawie szacowanie właściwości magnetycznych tlenków wybranych metali wraz z analizą przyczyn i rozmiarów takich właściwości, (2) budowa modeli funkcjonalizowanych kauczuków i ich reakcje utwardzania do gumy przy pomocy reakcji z siarką/tlenem, itp. (3) reakcje terminacji wybranych polimerów w procesie polimeryzacji w technologii CVD, poprzez spalanie w tlenie (reakcje chemiczne) wraz z możliwością funkcjonalizacji polimerów. 5--15. Obliczenia indywidualne prowadzone niezależnie przez każdego ze studentów nad zadaniem zagadnieniem.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawowa wiedza z fizyki, matematyki, chemii i mechaniki kwantowej.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	egzamin	51.0%	50.0%
	laboratorium	51.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur		1. Lucjan Piel, Idee Chemii Kwantowej, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wydawnictwo Wiley, 2007, 3. C. J. Ballhausen, H. B. Gray, Molecular Orbital Theory, Wydawnictwo W. A. Benjamin Inc. 1964,
	Uzupełniająca lista lektur		Yung-Kuo Lim, Problems and Solutions on Quantum Mechanics, Wydawnictwo World Scientific, 2005,
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Wykłady: 1. Oblicz zadane komutatory we wsp. kartezjańskich i wsp. sferycznych. 2. Znormalizuj zadane funkcje falowe. 3. Zortogonalizuj zadane bazy funkcji. 4. Narysuj konfiguracje elektronowe i oblicz spiny: atomu azotu, anionu atomu tlenu, kationu (III) żelaza, cząsteczki tlenu, anionorodnika cząsteczki tlenu, kationorodnika cząsteczki azotu. 5. Oblicz energie elektronowe zadanych konfiguracji elektronowych. 6. Oblicz stany i energie elektronowe dla funkcji falowej przedstawionej jako liniowa kombinacja stanu podstawowego i podwójnie wzbudzonego cząsteczki wodoru. 7. Jakie orbitale molekularne i atomowe byłyby obecne w cząsteczce NaCl w bazie DZ? Ile wyznaczników Slatera można skonstruować w metodzie pełnego CI? Co można zrobić aby zredukować liczbę możliwych konfiguracji elektronowych. 8. Kiedy i dlaczego stosuje się metody relatywistyczne w obliczeniach kwantowych? Co z wpływem elektronów relatywistycznych na całą pulę orbitali, w szczególności tych opisujących elektrony walencyjne? Laboratoria: 1. Oblicz mechanizm reakcji polimeryzacji zadanego polimeru. 2. Porównaj energie stanów elektronowych ferromagnetycznych tlenków żelaza (III).
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.